学校编码：10384　　分类号　　密级
学　　号：20520080150179　　UDC

厦门大学

博 士 学 位 论 文

货币族金属化合物的结构和光学性能研究

Structure and Optical Properties of Coinage Metal Complexes

贾建华

指导教师姓名：王泉明　教授
Prof. Alan L. Balch

专 业 名 称：物 理 化 学

论文提交日期：2012年5月
论文答辩时间：2012年6月
学位授予日期：2012年　月

答辩委员会主席：_____
评　阅　人：_____

2012 年 5 月

Structure and Optical Properties of Coinage Metal Complexes

A Dissertation Submitted to the Graduates School in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Doctor Philosophy

By

Jian-Hua Jia

Supervised by

Prof. Quan-Ming Wang

Prof. Alan L. Balch

Department of Chemistry

Xiamen University

May, 2012

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果，均在文中以适当方式明确标明，并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范（试行)》。

另外，该学位论文为（ 王泉明　教授　）课题（组）的研究成果，获得（　王泉明　教授　）课题（组）经费或实验室的资助，在（　王泉明课题组　）实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称，未有此项声明内容的，可以不作特别声明。)

声明人（签名)：

年　　月　　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

（　　）1.经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，于　　年　　月　　日解密，解密后适用上述授权。

（　√　）2.不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年　　月　　日

目　录

Content

论文用词简写

简写	名称或分子式
bdt	1,2-benzenedithiol
BPA	$HN(CH_2\text{-}2\text{-}C_5H_4N_2)$
bzim	1-benzyl-2-imidazolate
carb	$–C(OEt)=NC_6H_4CH_3\text{-}p$
cdpp	bis(diphenylphosphine)vinylidene
dbfphos	4,6-bis(diphenylphosphino)dibenzofuran
dcpe	1,2-bis(dicyclohexylphosphino)ethane
dcpm	bis(dicyclohexylphosphino)methane
DMSO	dimethylsulfoxide
dpephos	bis[(2-diphenylphosphino)phenyl]ether
dpepp	bis(2-diphenylphosphinoethyl)phenylphosphine
dppa	1,2-bis(diphenylphosphino)acetylene
dppb	1,4-bis(diphenylphosphino)butane
dppbe	1,2-bis(diphenylphosphino)benzene
dppbp	4,4’-bis(diphenylphosphino)biphenyl
dppe	1,2-bis(diphenylphosphino)ethane
dppf	1,1-bis(diphenylphosphino)ferrocene
dpph	1,6-bis(diphenylphosphino)hexane
dppp	1,3-bis(diphenylphosphino)propane
dpppe	1,5-bis(diphenylphosphino)pentane
dppm	bis(diphenylphosphino)methane
dppy	diphenyl-2-pyridylphosphine
IL	intraligand
im	imidazol
L	ligand
LMCT	ligand to metal charge transfer
M	metal
MC	metal-centered
mes	mesityl

MLCT	metal to ligand charge transfer
NSLF	non-linear least square fit
OLED	organic light emitting diode
OTf	trifluoromethylsulfonate
P	monodentate phosphine
P~P	bidentate phosphine
P~P~P	tridentate phosphine
py	pyridine
3,5-Ph_2pz	3,5-diphenylpyrazole
SeU	selenourea
THF	tetrahydrofuran
tht	tetrahydrothiophene
tmeda	N,N,N',N'-tetramethylenediamine
TPA	1,3,5-triaza-7-phosphaadamantane
Tab	4-(trimethylammonio)benzenethiolate
tacn	1,4,7-triazacyclononane
terpy	2,2':6',2"-terpyridine
Tfa	trifluoroacetate
Tol	tolyl
tpep	1,1,1-tris(diphenylphosphinoethyl)phosphine
$tpep^{Se}$	1,1,1-bis(diphenylphosphinoethyl)-1-(diphenylseleno phosphinoethylphosphine
VOCs	volatile organic compounds
VSEPR	valence shell electron pair repulsion
X	halogen
xantphos	9,9-dimethyl-4,5-bis(diphenylphosphino)xanthene

化合物索引

序号	简写	名称或分子式
1	**L1**	diphenyl-2-pyridylphosphine
2	**L2**	2-diphenylphosphino-3-methylpyridine
3	**L3**	2-diphenylphosphino-4-methylpyridine
4	**L4**	2-diphenylphosphino-5-methylpyridine
5	**L5**	2-diphenylphosphino-6-methylpyridine
6	**L6**	2-diphenylphosphino-6-methoxylpyridine
7	**A1**	$[CAu_6(\mathbf{L1})_6](BF_4)_2$
8	**A2**	$[CAu_6(\mathbf{L2})_6](BF_4)_2$
9	**A3**	$[CAu_6(\mathbf{L3})_6](BF_4)_2$
10	**A4**	$[CAu_6(\mathbf{L4})_6](BF_4)_2$
11	**A5**	$[CAu_6(\mathbf{L5})_6](BF_4)_2$
12	**A6**	$[CAu_6(\mathbf{L6})_6](BF_4)_2$
13	**A7**	$[CAu_6Ag_2(\mathbf{L1})_6](BF_4)_4$
14	**A8**	$[CAu_6Ag_2(\mathbf{L2})_6](BF_4)_4$
15	**A9**	$[CAu_6Ag_2(\mathbf{L3})_6](BF_4)_4$
16	**A10**	$[CAu_6Ag_2(\mathbf{L4})_6](BF_4)_4$
17	**A11**	$[CAu_6Ag_2(\mathbf{L6})_6](BF_4)_4$
18	**A12**	$[CAu_6Ag_2(\mathbf{L6})_4(\mathbf{L2})_2](BF_4)_4$
19	**A13**	$[CAu_6Cu_2(\mathbf{L1})_6](BF_4)_4$
20	**A14**	$[CAu_6Cu_2(\mathbf{L2})_6](BF_4)_4$
21	**A15**	$[CAu_6Cu_2(\mathbf{L3})_6](BF_4)_4$
22	**A16**	$[CAu_6Cu_2(\mathbf{L4})_6](BF_4)_4$
23	**A17**	$[CAu_6Ag_3(\mathbf{L5})_6](BF_4)_5$
24	**A18**	$[CAu_6Cu_3(\mathbf{L5})_6](BF_4)_5$
25	**A19**	$[CAu_6AgCu(\mathbf{L1})_6](BF_4)_4$
26	**A20**	$[CAu_6(PPh_3)_6](BF_4)_2$
27	**B1**	$[Au_4(\mu_2\text{-}S)_2(\mu\text{-dppb})_2]$
28	**B2**	$[Au_4(\mu_2\text{-}S)_2(\mu\text{-dppp})_2]$
29	**B3**	$[Au_5(\mu_3\text{-}S)_2(\mu\text{-dppp})_2]Cl$

30	**B4**	$[Au_5(\mu_3\text{-}S)_2(\mu\text{-}dppp)_2](BF_4)$
31	**B5**	$[Au_5(\mu_3\text{-}S)_2(\mu\text{-}dppp)_2](Tfa)$
32	**B6**	$[Au_5(\mu_3\text{-}S)_2(\mu\text{-}dppp)_2](OTf)$
33	**B7**	$[Au_{10}(\mu_3\text{-}S)_4(\mu\text{-}dcpm)_4]Cl_2$
34	**B8**	$[Au_{10}(\mu_3\text{-}S)_4(\mu\text{-}dcpe)_4]Cl_2$
35	**B9**	$[Au_9(AuCl)_2(\mu_3\text{-}S)_4(\mu\text{-}xantphos)_4]Cl$
36	**B10**	$[Au_{13}(\mu_3\text{-}S)_6(\mu\text{-}xantphos)_4]Cl$
37	**B11**	$[Au_{18}(\mu_3\text{-}S)_8(\mu\text{-}dppe)_6]Cl_2$
38	**B12**	$[Au_{18}(\mu_3\text{-}S)_8(\mu\text{-}dpephos)_6]Cl_2$
39	**B13**	$[Au_{12}(\mu_3\text{-}S)_4(\mu\text{-}dppm)_4]Cl_4$
40	**B14**	$[Au_{12}(\mu_3\text{-}S)_4(\mu\text{-}dppm)_4](PF_6)_4$
41	**B15**	$[Au_{10}(\mu_3\text{-}S)_4(\mu\text{-}PNP)_4](PF_6)_2$
42	**B16**	$[Au_{18}(\mu_3\text{-}S)_8(\mu\text{-}dppe)_6]\cdot H_2O$
43	**B17**	$[Au_6(\mu_3\text{-}Se)_2(\mu_3\text{-}dpepp)_2]Cl_2$
44	**B18**	$[Au_{14}(\mu_3\text{-}Se)_6(\mu_3\text{-}dppp)_5]Cl_2$
45	**B19**	$[Au_{18}(\mu_3\text{-}Se)_8(\mu_3\text{-}dppa)_6]Cl_2$
46	**B20**	$[(AuPPh_3)_3Se](PF_6)$
47	**B21**	$[(AuPPh_3)_4Se](OTf)_2$
48	**B22**	$[Au_{10}Se_4(dppm)_4]Br_2$
49	**B23**	$[Au_{18}Se_8(dppe)_6]Cl_2$
50	**B24**	$[Au_{18}Se_8(dppthph)_6]Cl_2$
51	**B25**	$[Au_{10}Se_5(dppa)_4\{Co_2(CO)_5\}_4]$
52	**B26**	$[Au_{10}Se_4(dppf)_4](NO_3)_2$
53	**D1**	[Au(PPh$_3$)(**PPT2**)]
54	**D2**	[Au(PPh$_3$)(**PPT3**)]
55	**D3**	$[Au_2(dppm)(\mathbf{PPT2})_2]\cdot 0.5CH_2Cl_2$
56	**D4**	$[Au_2(dppm)(\mathbf{PPT4})_2]\cdot CH_3COCH_3$
57	**D5**	$[Au_2(dppe)(\mathbf{PPT2})_2]$
58	**D6**	$[Au_2(dppe)(\mathbf{PPT3})_2]$
59	**D7**	$[Au_2(dppe)(\mathbf{PPT4})_2]$
60	**D8**	$[Au_2(dppp)(\mathbf{PPT2})_2]\cdot 3CH_2Cl_2\cdot CH_3CH_2OH$
61	**D9**	$[Au_2(dppb)(\mathbf{PPT2})_2]$
62	**D10**	$[Au_2(dppb)(\mathbf{PPT3})_2]\cdot 3CH_2Cl_2$